

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт – Физико-технический

Направление – Ядерные физика и технологии

Кафедра – Электроника и автоматика физических установок

Специальность – Электроника и автоматика физических установок

ДИПЛОМНЫЙ ПРОЕКТ

Тема работы
РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ФОРМИРОВАНИЯ РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА МОДЕЛИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ

УДК 620.22:004.415

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0702	Попов А.С.		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Обходский А.В.	канд. техн. наук, доцент		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	канд. филос. наук, доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Усов В.Ф.	канд. техн. наук		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ЭАФУ	Горюнов А.Г.	д-р техн. наук, доцент		

Томск – 2016 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Универсальные компетенции</i>	
Р1	Представлять современную картину мира на основе целостной системы естественнонаучных и математических знаний, а также культурных ценностей; понимать социальную значимость своей будущей профессии, обладать высокой мотивацией к выполнению профессиональной деятельности, защите интересов личности, общества и государства; быть готовым к анализу социально-значимых процессов и явлений, применять основные положения и методы гуманитарных, социальных и экономических наук при организации работы в организации, к осуществлению воспитательной и образовательной деятельности в сфере публичной и частной жизни.
Р2	Обладать способностями: действовать в соответствии с Конституцией РФ, исполнять свой гражданский и профессиональный долг, руководствуясь принципами законности и патриотизма, правилами и положениями, установленные законами и другими нормативными правовыми актами; к логическому мышлению, обобщению, анализу, прогнозированию, постановке исследовательских задач и выбору путей их достижения; понимать основы национальной и военной безопасности РФ; работать в многонациональном коллективе; формировать цели команды, применять методы конструктивного разрешения конфликтных ситуаций;

	использовать на практике навыки и умения в организации научно-исследовательских и научно-производственных работ.
P3	Самостоятельно, методически правильно применять методы самостоятельного физического воспитания для повышения адаптационных резервов организма и укрепления здоровья, готовностью к достижению и поддержанию должного уровня физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.
P4	Свободно владеть литературной и деловой письменной и устной речью на русском языке, навыками публичной и научной речи. Уметь создавать и редактировать тексты профессионального назначения, владеть одним из иностранных языков как средством делового общения.
P5	Находить организационно-управленческие решения в нестандартных ситуациях и нести за них ответственность; быть готовым к принятию ответственности за свои решения в рамках профессиональной компетенции, принимать решения в нестандартных условиях обстановки и организовывать его выполнение, самостоятельно действовать в пределах предоставленных прав; самостоятельно применять методы и средства познания, обучения и самоконтроля для приобретения новых знаний и умений, в том числе в новых областях, непосредственно не связанных со сферой деятельности, развития социальных и профессиональных компетенций.
P6	Применять основные законы естественнонаучных дисциплин, математический аппарат, вычислительную технику, современные методы исследований процессов и объектов для формализации, анализа и выработки решения профессиональных задач.

<i>Профессиональные компетенции</i>	
P7	<p>Уметь самостоятельно повышать уровень знаний в области профессиональной деятельности, приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения; использовать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт, методы научно-исследовательской и практической деятельности, современные компьютерные технологии и базы данных в своей предметной области; работать с информацией в глобальных компьютерных сетях; оценивать перспективы развития АСУ и АСНИ физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов атомной промышленности и энергетики), использовать современные достижения в научно-исследовательских работах.</p>
P8	<p>Применять знания о процессах в ядерных энергетических и физических установках, и о технологических процессах ядерного топливного цикла используя методы математического моделирования отдельных стадий и всего процесса для разработки АСУ ТП и АСНИ с применением пакетов автоматизированного проектирования и исследований.</p>
P9	<p>Использовать знания о протекающих процессах в ядерных энергетических установках, аппаратах производств ядерного топливного цикла, теории и практики АСУ ТП, при проектировании, настройке, наладке, испытаниях и эксплуатации современного оборудования, информационного, организационного, математического и программного обеспечения, специальных технических средств, сооружений, объектов и их систем; организовать эксплуатацию физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов</p>

	<p>атомной промышленности и энергетики), современного оборудования и приборов с учетом требований руководящих и нормативных документов; быть готовым к освоению новых образцов физических установок, составлению инструкций по эксплуатации оборудования и программ испытаний.</p>
P10	<p>Использовать технические средства и информационные технологии, проводить предварительное технико-экономического обоснования проектных расчетов устройств и узлов приборов и установок, расчет, концептуальную и проектную проработку программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ, применять методы оптимизации, анализа вариантов, поиска решения многокритериальных задач с учетом неопределенностей объекта управления, разрабатывать способы применения программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ, решать инженерно-физические и экономические задачи, применяя знания теории и практики АСУ, включающее математическое, информационное и техническое обеспечения, для проектирования, испытания, внедрения и эксплуатации АСУ ТП и АСНИ.</p>
P11	<p>Понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, соблюдать основные требования безопасности и защиты государственной тайны; выполнять мероприятия по восстановлению работоспособности физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов атомной промышленности и энергетики) при возникновении аварийных ситуаций, разрабатывать методы уменьшения риска их возникновения; проводить анализ и оценку обстановки для принятия решения в случае возникновения аварийных ситуаций, экологическую</p>

	безопасность, нормы и правило производственной санитарии, пожарной, радиационной и ядерной безопасности.
P12	Разрабатывать проекты нормативных и методических материалов, технических условий, стандартов и технических описаний средств АСУ ТП и АСНИ, регламентирующих работу в сфере профессиональной деятельности; осуществлять разработку технического задания, расчет, проектную проработку современных устройств и узлов приборов, установок (образцов вооружения, программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ), использовать знания методов анализа эколого-экономической эффективности при проектировании и реализации проектов.
P13	Использовать в профессиональной деятельности нормативные правовые акты в области защиты государственной тайны, интеллектуальной собственности, авторского права и в других областях; осуществлять поиск, изучение, обобщение и систематизацию научно-технической информации, нормативных и методических материалов в сфере своей профессиональной деятельности.
P14	Проявлять и активно применять способность к организации и управлению работой коллектива, в том числе: находить и принять управленческие решения в сфере профессиональной деятельности; разрабатывать планы работы коллективов; контролировать соблюдение технологической дисциплины, обслуживания, технического оснащения, размещения технологического оборудования; организовывать учет и сохранность физических установок (вооружения и техники), соблюдение требований безопасности при эксплуатации; использовать основные методы защиты персонала и населения

	от возможных последствий аварий, катастроф, стихийных бедствий.
P15	Демонстрировать способность к осуществлению и анализу научно-исследовательских, технологических и пуско-наладочных работ, разработке планов и программ их проведения, включая ядерно-физические эксперименты, выбору методов и средств решения новых задач с применением современных электронных устройств, представлению результатов исследований и формулированию практических рекомендаций их использования в формах научно-технических отчетов, обзоров, публикаций по результатам выполненных работ; выполнять полный объем работ, связанных с техническим обслуживанием физических установок с учетом требований руководящих и нормативных документов.

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт – Физико-технический
Направление – Ядерные физика и технологии
Кафедра – Электроника и автоматика физических установок
Специальность – Электроника и автоматика физических установок

УТВЕРЖДАЮ
Зав. кафедрой ЭАФУ ФТИ
_____ А.Г. Горюнов
«12» октября 2015 г.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Дипломного проекта

Студенту:

Группа	ФИО
0702	Попов А.С.

Тема работы:

Разработка алгоритма формирования расчетной модели для функционирования программного комплекса моделирования материалов	
Утверждена приказом директора ФТИ	от 23.11.2015 № 9128/с

Дата сдачи студентом выполненной работы	25 января 2016 г.
--	-------------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Объект исследования – программно-вычислительный комплекс компьютерного моделирования свойств материалов. 1. Алгоритм формирования расчетной модели должен обеспечивать использование различных базисных наборов для описания атомных орбиталей. 2. Типы моделируемых материалов: 1) Твердые тела: а) Кристаллические (органические и неорганические),
---------------------------------	---

	<p>б) Аморфные - неорганические (например - стекла), органические (описание одной молекулы).</p> <p>2) Жидкие: органические и неорганические (описание одной молекулы).</p> <p>3) Газообразные: органические и неорганические (описание одной молекулы).</p> <p>3. Программное обеспечение формирования расчетной модели должно функционировать на базе ЭВМ x86 с минимальными техническими характеристиками:</p> <ul style="list-style-type: none"> – частота процессора, ГГц – 1,5; – объем ОЗУ, ГБ – 2; – объем ПЗУ Гб – 250; – ОС Windows. <p>4. Для разработки ПО формирования расчетной модели должны применяться стандартные библиотеки программного пакета Qt.</p> <p>5. Алгоритм формирования расчетной модели должен обеспечивать использование расчетного метода Хартри-Фока.</p> <p>6. Программное обеспечение формирования расчетной модели должно обеспечивать задание структурной химической формулы материала и ее автоматическое преобразование в рациональную полуразвернутую формулу.</p> <p>7. Формат задания исходных данных для моделирования свойств материалов – графический с возможностью указания значений в виде текста.</p> <p>8. Форма представления входных и выходных данных в ПО формирования расчетной модели – .txt, .doc, .exe, .xml и др.</p> <p>9. Кроссплатформенность – ОС Windows, Linux.</p>
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<ul style="list-style-type: none"> – Аналитический обзор существующих программных комплексов для моделирования свойств атомных структур материалов. – Анализ методов моделирования свойств материалов. – Разработка алгоритма формирования расчетной модели по методу Хартри-Фока. – Разработка структуры ПО формирователя расчетной модели. – Разработка алгоритма функционирования ПО формирователя расчетной модели.

	<ul style="list-style-type: none"> – Программная реализация алгоритма формирования расчетной модели. – Испытание алгоритма и ПО формирователя расчетной модели. <p>В результате выполнения дипломной работы разработан алгоритм и ПО формирования расчетной модели, обеспечивающие расчет свойств материалов в составе программно-вычислительного комплекса компьютерного моделирования свойств материалов.</p>
Перечень графического материала	<p>Блок-схема алгоритма формирования расчетной модели (обязательная).</p> <p>Схема программы доступа (обязательная).</p> <p>Блок-схема алгоритма функционирования ПО формирования расчетной модели (обязательная).</p> <p>Чертеж формы графического интерфейса пользователя ПО формирования расчетной модели (обязательный).</p>

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	доцент, канд. филос. наук Меньшикова Е.В.
Социальная ответственность	доцент, канд. техн. наук Усов В.Ф.
Аналитический обзор	канд. тех. наук, доцент Обходский А.В.
Разработка алгоритма формирования расчетной модели для функционирования программного комплекса моделирования материалов	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	12 октября 2015 г.
---	--------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. ЭАФУ	Обходский А.В.	канд. тех. наук, доцент		12.10.15

Задание принял к исполнению студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0702	Попов А.С.		12.10.15

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работы 125 с., 17 рис., 22 источника, 40 формул, 15 таблиц, 2 приложения.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ХИМИЯ, КВАНТОВАЯ ХИМИЯ, ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ, МЕТОД ХАТРИ-ФОКА, МО ЛКАО, КО ЛКАО, БАЗИСНЫЙ НАБОР, АЛГОРИТМ РАСЧЕТА МАТЕРИАЛОВ, ФУНКЦИОНАЛ, ПРОГРАММА КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ.

Цель – разработка алгоритма функционирования программы формирования математической модели для программного комплекса моделирования материалов.

В работе был проведен обзор литературы по основным методам квантово-химических расчетов. Проведен сравнительный анализ различных методов и базисных наборов. Проведен обзор существующих программных продуктов. Составлено алгоритмическое обеспечение формирователя расчетной модели. Предъявлены основные требования к программе. Разработана программная реализация расчетного блока – подпрограммы формирователя расчетной модели.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ, НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

В данной работе использованы ссылки на следующие стандарты:

ГОСТ Р 53325–2012 Технические средства пожарной автоматики.
Общие технические требования и методы испытаний
ГОСТ 12.1.003–83 Система стандартов безопасности труда. Шум. Общие
требования безопасности

В данной работе применены следующие обозначения и сокращения:

формирователь расчетной модели; ФРМ.

программное обеспечение; ПО.

метод Хартри-Фока; ХФ.

теория функционала плотности; ТФП.

трудовой кодекс; ТК.

жидкокристаллический; ЖК.

техника безопасности; ТБ.

Видео дисплейный терминал; ВДТ.

электронно-вычислительная машина; ЭВМ.

персональная электронно–вычислительная машина; ПЭВМ.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	14
1 Аналитический обзор информационных источников	17
1.1 Обзор методов моделирования материалов	17
1.1.1 Метод Хартри-Фока.....	20
1.1.2 Теория функционала плотности	22
1.1.3 Приближения и функционалы.....	24
1.1.4 Базисные наборы для описания атомных орбиталей	26
2 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение..	29
2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	29
2.2 SWOT-анализ.....	30
2.3 Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	32
2.4 Инициация проекта.....	34
2.5 План проекта.....	36
2.6 Бюджет научного исследования	39
2.6.1 Основная заработная плата	39
2.6.2 Расчет потребляемого сырья	41
2.7 Группировка затрат по статьям	42
2.8 Оценка сравнительной эффективности исследования.....	42

ВВЕДЕНИЕ

Рост производительности вычислительной техники дает все большие возможности для расчетов, которые раньше произвести было невозможно. Одновременно с этим ростом идет расширение теоретической базы, задачи которой направлены как в сторону оптимизации существующих, так и создания новых методов расчетной оценки свойств атомных структур. Практически всегда существует спрос на новые материалы с выдающимися свойствами, применяемые в самых разных областях. Преимущества внедрения компьютерного моделирования новых материалов перед экспериментом очевидны. Получение теоретических значений свойств того или иного материала освобождает исследователей от ручных расчетов. С другой стороны, можно использовать компьютерное моделирование при исследовании свойств уже существующих материалов. В любом случае моделирование является выгодным как экономически, так и по временным затратам. К тому же, если использовать распределенные вычисления, то время моделирования существенно сокращается. У существующих программных комплексов распределение вычислений либо отсутствует, либо достигается с помощью установки дополнительного программного обеспечения, которые работают только на определенных вычислительных машинах. Тем не менее, предоставляются широкие возможности для расчетов в пределах одного кластера.

В таблице 1.1 представлен анализ наиболее популярных в России программных продуктов для квантовохимических расчетов.

					643.ФЮРА.00013-01 81 01					
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	Введение			Лит.	Лист	Листов
Разраб.	Попов									
Провер.	Одходский									
Консульт								ТПУ ФТИ Группа 0702		
Н. Контр.	Ефремов									
Утверд.	Горюнов									

Таблица 1.1 – Сравнительный анализ программных продуктов

Название	Условия распре- нения	Поддер- жка ММ	Поддер- жка ХФ	Поддер- жка ТФП	Поддер- жка GPU	Под- ка удал. расче- тов	Стру- кт- ние данных
Gaussian	Платная	+	+	+	-	-	-
PRIRODA-06	Бесплатная	-	+	+	-	-	-
ABINIT	Бесплатная	+	-	+	+	-	-
CRYSTAL	Бесплатная	+	+	+	-	-	-
GAMESS (US)	Бесплатная	+	+	+	+	-	-
GAMESS (UK)	Платная	-	+	+	+	-	-
ORCA	Бесплатная	+	+	+	-	-	-
TURBOMOLE	Платная	+	+	+	-	-	-
Octopus	Бесплатная	+	+	+	+	-	-
CP2K	Бесплатная	+	+	+	+	-	-
Firefly	Бесплатная	+	+	+	+	-	-

Большинство из программ, указанных в таблице обладают высоким входным порогом, благодаря тому, что входные данные заносятся в виде текстового документа. Те же, которые относительно просты в использовании имеют малое количество инструментов для работы с материалами, что ставит их универсальность под вопрос.

Так же следует отметить, что разрабатываемый программный комплекс будет использовать удаленные расчеты, чего нет ни в одной из перечисленных программ. Подразумевается возможность выбора места проведения расчетов

– либо на локальной СОД, либо на удаленной. Подключение к удаленной СОД будет производиться по сети, а сама СОД из себя представляет компьютер с большим запасом вычислительных ресурсов.

Под структурированием данных подразумевается СХД – система хранения данных, которая будет подобно СОД локальная и внешняя, где будут храниться результаты вычислений. Данная функция также отсутствует в приведенных примерах.

Следует прокомментировать самые популярные программные продукты на территории Российской Федерации. Одним из самых мощных программных продуктов, который поддерживает огромное количество методов вычислений, является программный пакет Gaussian, первый выпуск которого произошел в 1972 году. Он обладает большой точностью результатов вычислений, является кроссплатформенным, а также входные и выходные данные поддерживаются большим количеством вспомогательных программ. Однако Gaussian является очень дорогим продуктом, к тому же производит вычисления крайне медленно. Более рациональным является использование отечественного программного пакета PRIRODA, разработанного в МГУ и будучи бесплатным. По данным, представленным в [1], он в несколько раз выигрывает Gaussian по скорости, при этом практически не теряя, а иногда даже выигрывая в точности вычислений, но необходимо помнить, что в некоторых задачах Gaussian является незаменимым.

1 Аналитический обзор информационных источников

1.1 Обзор методов моделирования материалов

На сегодняшний день существует множество методов для расчета атомных структур. Каждый имеет свою специализацию, точность, критерии применимости и т.д. Наиболее известными из неэмпирических методов являются метод Хартри-Фока (ХФ) и теория функционала плотности (ТФП). Метод ХФ предшествовал созданию метода ТФП и был вполне самодостаточным в части состава определяемых свойств и точности. Однако это выполнялось только для элементарных соединений и элементов. Уже при расчетах средних систем сложность математического аппарата росла экспоненциально, следовательно, росла и ресурсоемкость. Вдобавок ко всему, значительно снижалась точность вычислений. Потеря точности в методе ХФ обусловлена тем, что он не учитывает корреляции электронов (влияние электронов друг друга). Существуют модифицированные методы ХФ, где эта корреляция учтена, однако, в сравнении с методом ТФП, они проигрывают в скорости вычислений. Причиной является то, что метод ХФ описывает систему многоэлектронной волновой функцией, в то время как метод ТФП описывает ее электронной плотностью. Следует отметить, что метод ТФП не является полностью аналитически достоверным, об этом свидетельствует работа [2], посвященная утверждениям, озвученными В. Коном (где кратко описаны основы ТФП) на нобелевской лекции, которым нет аналитического подтверждения.

Схема последовательности расчетов свойств материалов может быть обобщена как показано на рисунке 1.1.

					<i>643.ФЮРА.00013-01 81 01</i>		
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>	<i>Аналитический обзор информационных источников</i>		
<i>Разраб.</i>	<i>Попов</i>						
<i>Провер.</i>	<i>Обходский</i>						
<i>Консульт</i>							
<i>Н. Контр.</i>	<i>Ефремов</i>						
<i>Утверд.</i>	<i>Горюнов</i>				<i>Лит.</i> <i>Лист</i> <i>Листов</i>		
					<i>ТПУ</i> <i>ФТИ</i>		
					<i>Группа</i> <i>0702</i>		

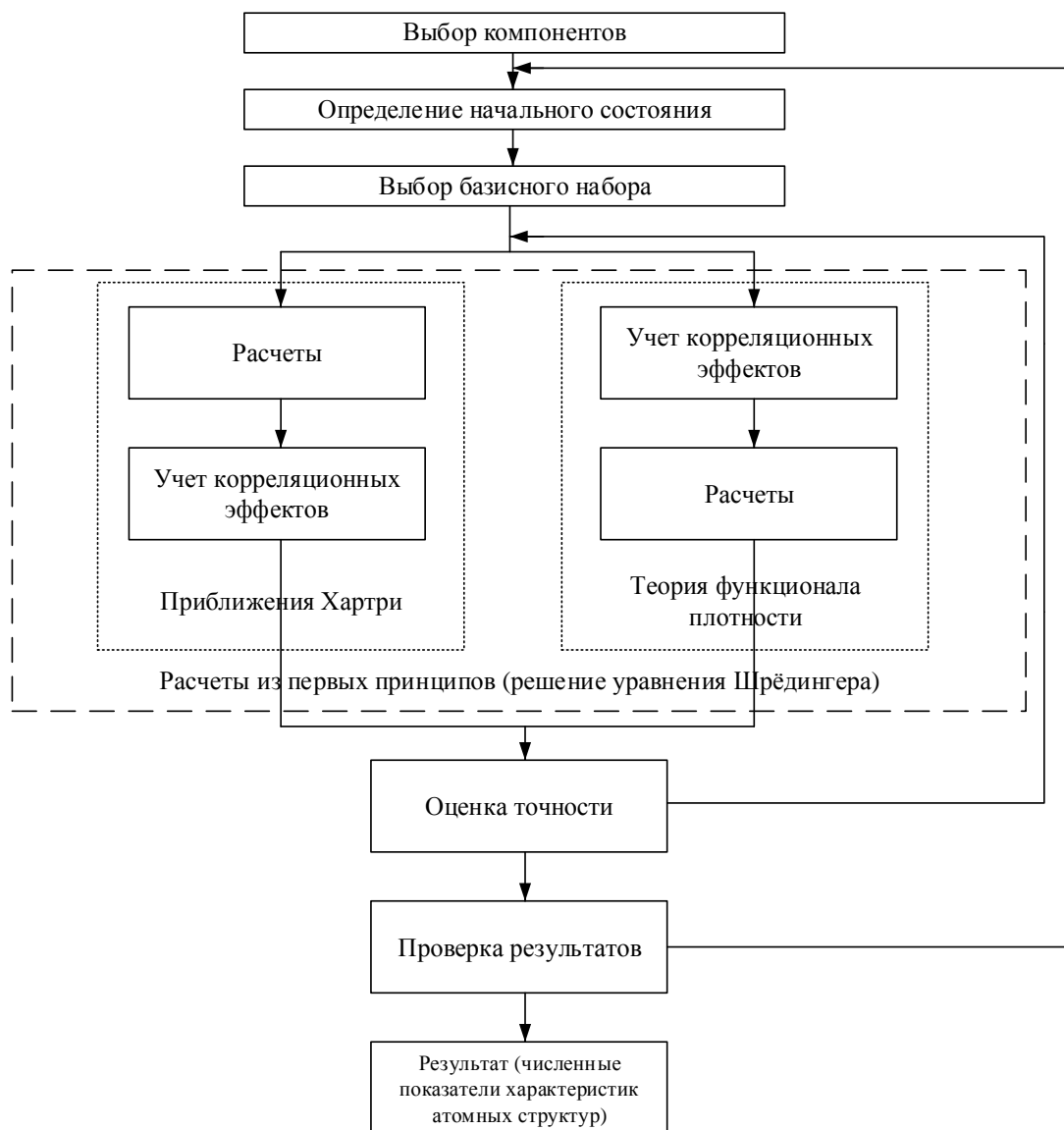


Рисунок 1.1 – Общая схема алгоритма расчета свойств материалов

Первым шагом является выбор компонентов. На втором шаге определяется начальное состояние системы. К примеру, температура (которая впоследствии может снижаться до 0). Как правило, колебательные процессы вносят меньший вклад по сравнению с кулоновскими взаимодействиями при формировании кристаллической решетки, но для повышения точности вычислений необходимо учитывать этот фактор.

От следующего шага – выбора базисного набора, сильно зависит время вычислений, поскольку неправильно выбранные данные могут рассчитываться крайне долго. На данном этапе осуществляется выбор, как

производить предварительную оценку кристаллической решетки и атомных орбиталей. Выбор базисного набора подробнее описан далее.

Следующим шагом является решение уравнения Шредингера. Поскольку решить это уравнение для более, чем одного электрона в атоме не представляется возможным, были предложены приближения, которые не учитывают некоторые свойства электронов, но при этом задача решения уравнения Шредингера в том или ином виде становится доступной.

Для оценки атомных структур могут использоваться два метода расчета из первых принципов – первый использует приближения Хартри, а второй – теорию функционала плотности. Принципиальное различие этих методов состоит в том, что в методе Хартри каждый электрон рассматривается как изолированный и на него действует некое поле, которое состоит из совокупности полей, создаваемых ядрами. При этом не учитываются корреляционные эффекты, которые можно определить после расчетов. Так же, в некоторых случаях, учитывая эти эффекты, можно произвести расчеты заново, это позволит увеличить точность, но вычислительный процесс займет больше времени.

Методом, требующим меньшее количество вычислительных ресурсов, является ТФП. В нем совокупность электронов рассматривается как некий функционал, вид которого зависит от поставленной задачи. Несмотря на выигрыш во времени вычислений, в некоторых расчетах метод ТФП проигрывает по точности методам Хартри. В последнее время точность метода ТФП соизмерима с точностью по методу Хартри, поскольку именно для метода ТФП теоретическая база, позволяющая оптимизировать вычисления и учесть большее количество квантовых эффектов, разрабатывается более успешно. Следует отметить, что этот метод учитывает корреляционные эффекты до самих вычислений (или во время вычислений) и это является одним из его наиболее успешных решений для уменьшения времени вычисления и повышения точности. Другими словами, если бы эти эффекты не учитывались в методе Хартри после вычислений, то несомненно ТФП

обходил бы его по всем параметрам. Про различия этих методов на практике написано в [3].

После расчетов необходимо проверить результаты. Сначала производится проверка геометрических составляющих. Насколько данные предыдущей итерации отличаются от тех, что получились для момента оптимизации атомной системы. Если отличия слишком большие, то имеет смысл повторить расчеты с новыми полученными данными о кристаллической решетке.

Следующим этапом будет проверка остальных результатов. Здесь необходимо руководствоваться различием полученной величины от экспериментальных значений.

Если оба предыдущих этапа прошли успешно, то результаты можно использовать по-разному. Например, в принципе, ТФП метод используется для вычислений геометрических параметров кристаллической решетки [4], а также энергии связи между ее узлами [5], [6], [7], [8]. По результатам вычислений атомной структуры можно вычислить прочность [9], [10]; электронную структуру [7], [11], [12], [13]; зонную структуру и магнитные свойства [4]; границы формирования зерен и их свойства [14]; оптические свойства [15]; поверхностная энергия [16].

1.1.1 Метод Хартри-Фока

Один из методов, который позволяет получить решение для многочастичной системы является метод Хартри-Фока. Как уже упоминалось, идея метода Хартри заключается в том, что каждый отдельно взятый электрон движется независимо от других, при этом на него действует внешнее поле ядер и остальных электронов. Электростатическое поле, создаваемое усредненной зарядовой плотностью, является заменой действия на данный электрон остальными. Позднее метод Хартри модифицировался Фоком и Слейтером:

учет принципа Паули при составлении многочастичной волновой функции. Таким образом, метод Хартри-Фока учитывает обменное взаимодействие.

Пусть каждый электрон обладает своей волновой функцией (орбиталью) φ_i , тогда полная волновая функция всех N электронов представляется в виде детерминанта Слейтера (это является основным вкладом Фока в метод Хартри [17]):

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(r_1) & \varphi_1(r_2) & \cdots & \varphi_1(r_N) \\ \varphi_2(r_1) & \varphi_2(r_2) & \cdots & \varphi_2(r_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(r_1) & \varphi_N(r_1) & \cdots & \varphi_N(r_N) \end{vmatrix}. \quad (1.1)$$

При подстановке данной многоэлектронной волновой функции в уравнение Шредингера, применив вариационный принцип Ритца, получаем:

$$\delta \left[\frac{\int \Psi^* (H - E) \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV} \right] = 0. \quad (1.2)$$

Если учесть условие ортонормируемости волновых функций φ_i , получается уравнение Хартри-Фока, так же выражение для оператора Фока:

$$\hat{F}_i \varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r), \quad \hat{F}_i = -\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m} + V_c(r) + V_{xi}(r), \quad (1.3)$$

где $V_c(r)$ – кулоновская потенциальная энергия в точке, r , $-\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m}$ – оператор кинетической энергии, $V_{xi}(r)$ – обменный потенциал, содержащий произведения всех одноэлектронных волновых функций:

$$V_{xi}(r) = - \frac{\sum_j \rho_j \int \frac{\varphi_i^*(r) \varphi_j^*(r') \varphi_j(r) \varphi_i(r')}{|r - r'|} dr'}{2\varphi_i^*(r) \varphi_i(r)}. \quad (1.4)$$

Значительно затрудняет решение уравнений Хартри-Фока зависимость оператора \hat{F}_i от одноэлектронных волновых функций. Решаются такие уравнения итерационным путем: с помощью начальных функций φ_i находят \hat{F}_i , затем находится новый набор одноэлектронных волновых функций, эти шаги повторяются до достижения критерия сходимости (самосогласования) [18].

Метод Хартри-Фока долгое время оставался лучшим методом для расчета атомных структур, но для крупных систем, вследствие большого количества перекрестных обменных интегралов, возникают трудности. Так же, учитывая обменное взаимодействие, метод не учитывает корреляционные эффекты, что является главным недостатком данного метода.

Наиболее успешным методом решения уравнений Хартри-Фока стал метод Рутана [19], использующий гауссовы базисные функции аналогично методу теории функционала плотности.

1.1.2 Теория функционала плотности

Теоретическая база ТФП появилась в 1964 году, когда была опубликована теорема Хоэнберга-Кона.

Электронная плотность $\rho(\vec{r})$ основного состояния многоэлектронной системы, которая находится во внешнем потенциале $V_{\text{внеш}}$, однозначно определяет этот потенциал. Она также дает полный гамильтониан системы, поскольку определяет число частиц.

Выходит, выходные данные решения задач, связанных с электронной плотностью эквивалентно данным, полученным решением уравнения Шредингера, при этом ожидаемое значение любой физической наблюдаемой

величины L для системы, находящейся в основном состоянии является функционалом электронной плотности основного состояния.

$$\langle \Psi | \hat{L} | \Psi \rangle = L[\rho(\vec{r})]. \quad (1.5)$$

Создаваемый атомными ядрами потенциал определяется их расположением, а источниками внешнего потенциала являются ядра. Из формулировки теоремы следует, что распределение электронной плотности в молекуле обуславливает не только расположения ядер, но и само расположение можно определить, зная функцию $\rho(\vec{r})$.

Практическую основу метода заложили уравнения Кона-Шэма, на которых базируют метод, разработанный У. Коном и Л. Шемом на основе теоремы Хоэнберга-Кона. Ниже приводится уравнение Кона-Шэма (одночастичное уравнение), которое совпадает с уравнением невзаимодействующих, которые двигаются в некоем эффективном потенциале V_{ef} , который, в свою очередь, учитывает взаимодействие между частицами:

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta + V_{ef}(\vec{r}) - \varepsilon_j \right] \phi_j(\vec{r}) = 0, \quad (1.6)$$

Где ε_i – лагранжев множитель;

$$V_{ef}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \int \frac{\tilde{\rho}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + E_{xe}(\vec{r}). \quad (1.7)$$

$V(\vec{r})$ – внешний потенциал;

$E_{xe}(\vec{r})$ – локальный обменно-корреляционный потенциал, функционально зависящий от полного распределения плотности:

$$E_{xc}(\vec{r}) = \int f_{xc}(\rho(\vec{r})) dv. \quad (1.8)$$

Здесь $f_{xc}(\rho(\vec{r}))$ – функция от электронной плотности, с заранее заданным видом. Сама плотность рассчитывается по формуле:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N |\varphi_j(\vec{r})|^2 \quad (1.9)$$

Следует отметить, что энергия корреляции и обменная энергия носят нелокальный характер, другими словами, зависят от электронной плотности не только в заданной точке r , но и в ближайших областях пространства.

1.1.3 Приближения и функционалы

Для однородного электронного газа наиболее точным является приближение локальной плотности (Local Density Approximation – LDA), которое является наиболее простым и не учитывает вышеупомянутую зависимость. Не смотря на низкую точность расчетов, приближение используется и по сей день [10].

Градиентное приближение (Generalized Gradient Approximation – GGA) является приближением более высокого порядка и учитывает изменение плотности во время переходов к соседним точкам:

$$E_{xc}[p] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}\{\rho(\vec{r}), \nabla \rho(\vec{r})\} d\vec{r}. \quad (1.10)$$

В большинстве случаев потенциал $E_{xc}[p]$ записывается как сумма обменного $E_x[p]$ и корреляционного $E_c[p]$ функционалов. В качестве примера этих функционалов можно привести: для приближения LDA

используется обменный функционал Слэтера (S) и корреляционный функционал Воско-Вилка-Нусера (VWN); для приближения GGA обменные функционалы Беке (B86, B88), функционалы Пердю-Янга (PW86, PW91) и корреляционный функционал Пердю (P86), функционал Ли-Янга-Парра (LYP).

При расчетах часто используют функционалы, полученные разными авторами в сочетаниях, к примеру обменный функционал Слэтера (S) и корреляционный функционал Воско-Вилка-Нусера (VWN). Обозначается такое сочетание соответственно SVWN. Наиболее часто (особенно в настоящее время) используются так называемые гибридные методы [20], в которые могут входить обменные и корреляционные функционалы разных видов. Функционал B3LYP является одним из самых популярных гибридных функционалов:

$$E_{xc} = (1 - a_0)E_x^{LSDA} + a_0E_x^{HF} + a_x\Delta E_x^{B88} + a_cE_c^{LYP} + (1 - a_c)E_c^{VWN}; \quad (1.11)$$

$$a_0 = 0,20; a_x = 0,72; a_c = 0,81.$$

Функционал B3LYP включает три компоненты обменного функционала (функционал Слейтера, Хартри-фоковский обменный оператор, функционал Бекке), корреляционная часть состоит из функционалов Воско-Вилка-Нусара (VWN) и Ли-Янга-Парра (LYP). Отличительной чертой такого подхода является то, что компоненты обменного функционала берутся с весовыми коэффициентами, которые подобраны с помощью сравнения с экспериментальными данными. В итоге метод часто подвергается критике, т.к. приобретает черты полуэмпирических методов. В результате необходимости расчета обменных интегралов метод уступает по времени расчета большинству других функционалов.

Следует отметить, что B3LYP не является лучшим, в настоящее время существует множество других функционалов, которые по точности

превосходят B3LYP. Например, HCTH – функционал Хампрехта-Коэна-Тохера-Хэнди. Не смотря на это, для решения поставленной задачи, расчета материала Al3-Ti будет использован функционал B3LYP, поскольку он, не смотря на относительную простоту, хорошо воспроизводит электронное строение элементов I-III групп [21]. Если результаты будут некорректными, можно воспользоваться функционалом PBE0, который лучше, чем B3LYP воспроизводит электронное строение d- и f-элементов [6]. Подробнее про точность определенных функционалов в совокупности с определенными базисами описано в работе [8].

1.1.4 Базисные наборы для описания атомных орбиталей

Прежде, чем описывать алгоритм вычислений по методу ТФП, следует упомянуть о базисных наборах. Базисный набор – это набор функций, с помощью которого описываются атомные орбитали. Как известно, атомные орбитали представляют собой одноэлектронную волновую функцию, которая определена из решения уравнения Шредингера. Другими словами, места, где наиболее вероятно обнаружение электрона и есть атомная орбиталь. Следовательно, любая атомная орбиталь характеризует «пространственную» электронную плотность. Значит, базисный набор (или просто базис) характеризует молекулярные орбитали, а значит и электронную плотность в заданном пространстве.

Сам метод является итерационным – на каждом шаге вычисляется электронная плотность, значение которой приближается к истинной. Прежде, чем начать такие расчеты, задается “затравочная” плотность (initial guess) в виде базисов.

В настоящий момент существует огромное количество базисов, ниже будут рассмотрены наиболее простые, но не потерявшие популярность ввиду хороших результатов вычислений.

Простейшим базисным набором является STO-nG. Фундаментально он представляет из себя атомную орбиталь слейтеровского типа, которая аппроксимируется n функциями гауссова типа. Другими словами, любая атомная орбиталь состоит из суммы n гауссовых функций, при этом сами коэффициенты функций Гаусса выбраны так, чтобы приближенно описывать поведение слейтеровских орбиталей при помощи их линейных комбинаций.

Наиболее популярен из этих базисных наборов STO-3G, так как при тестовых расчетах показано, что, когда n больше трех, результаты практически совпадают, а при n равном двум не достигается необходимая точность.

В любом минимальном базисном наборе невозможно изменить размер орбитали в зависимости от размера молекулы и это является недостатком таких наборов, который приводит, к примеру, к ошибке сравнительных расчетов ионов и нейтральных молекул. Эти недостатки устраняются увеличением гибкости атомных орбиталей при использовании биэкспоненциальных (double zeta) или валентно-расщепленных базисных наборов. В биэкспоненциальных базисах атомные орбитали состоят из двух частей: внешней (более диффузной) и внутренней (более компактной). В валентно-расщепленных, как видно из названия, разделены только валентные орбитали. Среди последних наиболее распространенным является базис 6-31G (орбиталь остова состоит из шести гауссовых функций, валентные разделены на компактную, которая состоит из трех гауссовых функций и диффузную, состоящую из одной гауссовой функции).

Часто используются сразу два базиса – с помощью одного оптимизируется геометрия, с помощью другого выполняется расчет для одной геометрической конфигурации. К примеру, в базисе 6-31G//STO-3G базис STO-3G выполняет первую функцию, 6-31G – вторую. Вызвано такое разделение необходимостью в повышении точности вычислений.

Существуют модификации вышеупомянутых базисов, а также сотни других. Отметим, что выбор базиса определяется необходимой точностью вычислений, а также вычислительными ресурсами ЭВМ. Необходимо

помнить, что затраты машинного времени пропорциональны числу базисных функций, возведенному в четвертую степень. Оптимизация геометрии, как правило, проводится на простых базисах, затем, с помощью более сложных, осуществляется расчет поправок, который связан с учетом корреляции электронов. Время расчетов при таком подходе значительно сократится, а точность в большинстве случаев сопоставима с расчетами в более широком базисе, при полной оптимизации.

Достаточно хорошие результаты при оптимизации геометрии элементов третьего периода получаются при использовании относительно простого базиса 3-21G*. Для оптимизации более больших молекул при отсутствии возможности воспользоваться более сложным базисом (к примеру, при нежелании ждать большое время), советуется предварительно оптимизировать геометрию методами молекулярной динамики.

2 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

2.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Поскольку рынок и технологии находятся в постоянном движении и развитии, необходимо проводить детальный анализ конкурирующих разработок. Данный анализ позволит внести коррективы в развитие научного исследования, а также даст оценку сильным и слабым сторонам всем конкурентным разработкам.

Анализ конкурентных технических решений целесообразно проводить с помощью оценочной карты (таблица 5.1).

Таблица 5.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Бф	Бк1	Бк2	Кф	К1	К2
Цена	0,25	9	3	9	2,25	0,75	2,25
Поддержка методов моделирования	0,2	3	8	6	0,6	1,6	1,2
Поддержка GPU	0,1	3	3	3	0,3	0,3	0,3
Поддержка удаленных расчетов	0,1	5	4	1	0,5	0,4	0,1
Структурирование данных	0,1	4	4	1	0,4	0,4	0,1

					643.ФЮРА.00013-01 81 01					
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение			Лит.	Лист	Листов
Разраб.	Попов									
Провер.	Обходский									
Консульт	Меньшикова									
Н. Контр.	Ефремов									
Утверд.	Горюнов							ТПУ ФТИ Группа 0702		

Удобство интерфейса	0,07	6	4	3	0,42	0,28	0,21
Производительность	0,05	5	3	5	0,25	0,15	0,25
Количество параметров на выходе	0,05	4	5	4	0,2	0,25	0,2
Визуализация	0,05	4	4	4	0,2	0,2	0,2
Занимаемое место на диске	0,03	5	2	4	0,15	0,06	0,12
Итого:	1	48	40	40	5,27	4,39	4,93

Из таблицы 5.1 можно сделать вывод о том, что наиболее важными параметрами являются цена и поддержка как можно большего числа методов расчета. Последнее делает программу универсальной, что является очень важным критерием оценки.

2.2 SWOT-анализ

Для объективного оценивания конкурентоспособности и перспектив развития разработки необходимо проанализировать сильные и слабые стороны, а также угрозы и возможности, которые могут повлиять на разработку. SWOT-анализ позволит сформировать направление, в котором необходимо работать, чтобы повысить конкурентоспособность научной разработки.

Для составления итоговой матрицы SWOT-анализа необходимо определить сильные и слабые стороны проекта, угрозы и возможности проекта, а также взаимную корреляцию между ними.

Сильными сторонами разрабатываемого проекта являются удобство использования, скорость расчета, а также универсальность к различным атомным системам.

Слабыми сторонами проекта являются малая точность и малое количество поддерживаемых методов.

Возможностями проекта является внедрение других методов моделирования и повышение скорости вычислений за счет оптимизации кода.

Угрозой данному проекту является теоретическое появление метода моделирования, основанного на других принципах, неприменимых к общему алгоритму модуля.

Корреляция между сильными и слабыми сторонами проекта с возможностями и угрозами отображена в итоговой матрице SWOT-анализа (таблица 5.2).

Таблица 5.2 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	<p>Сильные стороны проекта:</p> <p>C1. Удобство в использовании.</p> <p>C2. Скорость расчета.</p> <p>C3. Универсальность к разным системам.</p>	<p>Слабые стороны проекта:</p> <p>Сл1. Относительно низкая точность.</p> <p>Сл2. Малое количество поддерживаемых методов.</p>
<p>Возможности проекта:</p> <p>B1. Внедрение других методов.</p> <p>B2. Повышение скорости вычислений.</p>	<p>Внедрение увеличит универсальность.</p> <p>Повышение скорости вычислений увеличит скорость расчета.</p>	<p>Внедрение увеличит точность и количество методов.</p>

Угрозы проекта: У1. Появление более быстрого и достоверного метода, который невозможно будет интегрировать в проект.	При таком случае необходимо будет увеличить скорость расчета или достоверность данных.	Необходимо добавлять методы, которые можно интегрировать.
---	--	---

2.3 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На любой стадии жизненного цикла проекта полезно оценивать степень его готовности к коммерциализации. Для этого необходимо оценить степень проработанности научного проекта и уровень имеющихся знаний у разработчика (таблица 5.3).

Таблица 5.3 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
Определены перспективные направления коммерциализации задела	4	4

Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	4
Определена товарная форма задела для представления на рынок	2	2
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	1	1
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	1	1
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	1	1
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	1	1
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	2	2
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	2	2
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	1	1

Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	1	1
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	1	1
Проработан механизм реализации научного проекта	2	2
ИТОГО БАЛЛОВ	28	28

Исходя из оценок степени готовности проекта к коммерциализации видно, что проект имеет низкую степень готовности. По вопросам маркетинговых исследований, финансирования коммерциализации, необходимо привлечение в команду проекта специалистов из данных областей.

2.4 Инициация проекта

Инициация проекта состоит из процессов, которые выполняются для нового проекта или новой стадии проекта. Для этого определяются начальные цели, содержание, фиксируются ресурсы. Также определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта.

Заинтересованные стороны проекта отображены в таблице 5.4.

Таблица 5.4 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Министерство Образования и Науки РФ	Получение алгоритма формирователя расчетной модели

НИ ТПУ, кафедра ЭАФУ	Внедрение формирователя расчетной модели в разрабатываемый программный комплекс
----------------------	---

В таблице 5.5 представлена информация о целях проекта, критериях достижения целей, а также требования к результатам проекта.

Таблица 5.5 – Цели и результаты проекта

Цели проекта	Формирование исходных данных для расчета двухэлектронных интегралов
Ожидаемые результаты проекта	Значительное уменьшение времени моделирования свойств атомных структур
Критерии приемки результата проекта	Адекватность исходных данных. Поддержка надежного метода моделирования.
Требования к результату проекта	Необходимая точность и скорость вычислений. Универсальность к большому количеству систем.

Рабочая группа проекта отображена в таблице 5.6.

Таблица 5.6 – Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час.
Обходский А.В., НИ ТПУ, кафедра ЭАФУ, доцент	Научный руководитель	Контроль выполнения работ, принятие решений, выдача задания.	432

Попов А.С., НИ ТПУ, кафедра ЭАФУ, техник	Инженер (дипломник)	Анализ литературных источников, создание алгоритма, программирование	1312
--	------------------------	---	------

2.5 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный график проекта, который может быть представлен в виде линейного графика или диаграммы Ганта.

Линейный график представлен в таблице 5.7.




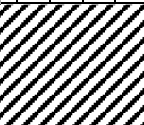
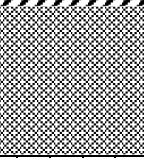


Таблица 5.7 – Календарный план проекта

Код работы	Название	Длитель ность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Составление технического задания	4	06.06.15	09.06.15	Обходский А.В.
2	Анализ существующих программных продуктов	13	10.06.15	22.06.15	Попов А.С.
3	Анализ методов моделирования материалов	25	23.06.15	16.07.15	Попов А.С.

4	Составление алгоритма функционирования компонента	50	17.07.15	27.08.15	Попов А.С., Обходский А.В.
5	Внедрение в алгоритмы программного комплекса	13	28.08.15	09.09.15	Попов А.С.
6	Программная реализация алгоритма	84	10.09.15	30.10.15	Попов А.С.

Календарный план в виде диаграммы Ганта представлен в таблице 5.8.

Таблица 5.8 – Диаграмма Ганта

Код работы	Вид работ	Исполнитель и	Т _к , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ																	
				июн			июл			авг			сен			окт			ноя		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	Составление ТЗ	Руководите ль	4																		
2	Анализ существующих программных продуктов	Дипломник	13																		
3	Анализ методов моделирования материалов	Дипломник	25																		
4	Составление алгоритма функционирования компонента	Дипломник, Руководите ль	50																		
																					
5	Внедрение в алгоритмы программного комплекса	Дипломник	13																		
6	Программная реализация алгоритма	Дипломник	84																		



– Руководитель



– Дипломник

2.6 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения.

В данной научной разработке планируемыми расходами являются основная заработная плата, дополнительная заработная плата, отчисления на социальные нужды, накладные расходы, а также расходы на электроэнергию при работе с компьютером.

2.6.1 Основная заработная плата

В данную статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников. Величина расходов определяется из трудоемкости выполняемых работ. Расчет основной заработной платы представлен в таблице 9.

Основная заработная плата работника рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{\text{осн}} = З_{\text{дн}} \cdot T \quad (5.1)$$

где $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата;

$З_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника;

T – продолжительность работ, выполняемых работником.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{\text{дн}} = \frac{З_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}} \quad (5.2)$$

где Z_m – оклад работника;

M – количество месяцев работы без отпуска в год;

F_d – годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала.

Таблица 5.9 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней	115	115
- выходные дни		
- праздничные дни		
Потери рабочего времени	24	24
- отпуск		
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	226	226

Таким образом, для студента:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d} = \frac{8000 \cdot 10,4}{226} = 368 \text{ руб/день}; \quad (5.3)$$

Для руководителя:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d} = \frac{23264 \cdot 10,4}{226} = 1070 \text{ руб/день}. \quad (5.4)$$

Расчет основной работной платы производится по формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (5.5)$$

и представлен в таблице 5.10.

Таблица 5.10 – Расчет основной заработной платы

Этап	Исполнитель	Трудоемкость, чел.-дн.	З/п на один чел.- дн.,р	Всего з/п, р.
Составление ТЗ	Руководитель	4	1070	4280
Анализ существующих программных продуктов	Дипломник	13	368	4784
Анализ методов моделирования материалов	Дипломник	25	368	9200
Составление алгоритма функционирования компонента	Дипломник Руководитель	50	368 + 1070	71900
Внедрение в алгоритмы программного комплекса	Дипломник	13	368	4784
Программная реализация алгоритма	Дипломник	84	368	30912
Итого:	125860			

2.6.2 Расчет потребляемого сырья

Основным потребляемым сырьем в данной научной разработке является потребление электроэнергии компьютером. Для расчета стоимости потребляемой электроэнергии необходимо знать потребляемую мощность компьютером, время работы и текущий тариф на электроэнергию.

$$C_{\text{эз}} = 8 \cdot D \cdot T \cdot M = 8 \cdot 189 \cdot 4,36 \cdot 0,1 = 659,2 \text{ р} \quad (5.6)$$

где 8 – часов в рабочем дне, Д – продолжительность работ, Т – тариф на электроэнергию, М – мощность, потребляемая ноутбуком.

2.7 Группировка затрат по статьям

Группировка затрат по статьям отображена в таблице 5.11.

Таблица 5.111 – Группировка затрат по статьям

Основная з/п	Доп. з/п	Отчисления на соц. нужды	Прочие прямые расходы	Накладные расходы	Итого себестоим ость
125860	12586	44051	659,2	12586	195742,2

Итого получилось 195742,2 р. Стоимость компьютера составляет 17000 р, с учетом ее, итоговая стоимость составляет 212742,2 р.

2.8 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат для вариантов исполнения научного исследования. Для разрабатываемого формирователя расчетной модели затратами на разработку модели, или 212742,2 рублей. В качестве аналога выступает другой формирователь расчетной модели, стоимость разработки которого составила 254982,4 р.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется :

$$I_p^\Phi = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{212742,2}{254982,4} = 0,834; \quad (5.7)$$

Интегральный финансовый показатель аналога I_Φ^a :

$$I_\Phi^a = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} = \frac{254982,4}{254982,4} = 1; \quad (5.8)$$

Показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения определяется как сумма произведений балла критерия на его оценку. Интегральный показатель ресурсоэффективности рассчитан в таблице 5.12.

Таблица 5.122 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий	Весовой коэффициент	Текущий проект	Аналог
1 Способствует росту производительности	0,15	5	5
2 Удобство в эксплуатации	0,15	4	3
3 Помехоустойчивость	0,05	4	4
4 Энергосбережение	0,2	4	4
5 Надежность	0,2	4	5
6 Материалоемкость	0,25	3	2
Итого	1	24	23

Интегральный показатель эффективности разработки $I_{финр}^p$ определяется так:

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_m^p}{I_{\text{ф}}^p} = \frac{3,9}{0,834} = 4,67; \quad (5.9)$$

Интегральный показатель эффективности аналога $I_{\text{финр}}^a$ определяется по формуле:

$$I_{\text{финр}}^a = \frac{I_m^a}{I_{\text{ф}}^a} = \frac{3,7}{1} = 3,7; \quad (5.10)$$

Сравнение интегральных показателей эффективности текущего проекта и аналога позволяет определить сравнительную эффективность проекта $\Xi_{\text{ср}}$:

$$\Xi_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^a} = \frac{4,67}{3,7} = 1,26. \quad (5.11)$$

Результаты расчетов сравнительной эффективности проекта приведены в таблице 5.13.

Таблица 5.13 – Сравнительная эффективность проекта

№ п/п	Показатели	Аналог	Разработка
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	0,834
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,7	3,9
3	Интегральный показатель эффективности	3,9	4,67

4	Сравнительная эффективность проекта	1,26
---	--	------